

PACS: 73.40.Gk, 75.50.Ce, 85.30.Mn

Т.А. Хачатурова¹, А.Ю. Власенко²

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНУЮ ПРОВОДИМОСТЬ ТУННЕЛЬНЫХ КОНТАКТОВ С ФЕРРОМАГНИТНЫМ ЭЛЕКТРОДОМ

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина

²Донецкий национальный технический университет

Статья поступила в редакцию 6 июля 2018 года

В рамках полуклассического приближения рассчитаны зависимости дифференциальной туннельной проводимости от напряжения смещения туннельных контактов ферромагнитный металл–изолятор–металл (FM–I–M). Показано, что при напряжении, соответствующем энергии Ферми зоны со спином вниз, имеется особенность, представляющая собой заметный излом на кривой дифференциальной проводимости. Нечетная часть дифференциальной проводимости, рассчитанная для симметричного прямоугольного барьера, отлична от нуля. Анализ показывает, что этот факт отражает асимметрию электронного строения металлического и ферромагнитного электродов.

Ключевые слова: дифференциальная проводимость, ферромагнитный электрод, энергия Ферми, барьерные характеристики

Введение

Необходимость детального изучения электронных свойств ферромагнитных металлов, играющих роль электродов в магниторезистивных контактах, вызвана интересом, который проявляется на протяжении последнего десятилетия к спин-зависимому туннелированию в таких контактах. К настоящему времени можно считать твердо установленным тот факт, что в контактах FM–I–M в туннельном процессе принимают участие две параболические d -зоны: со спином вверх и со спином вниз. Последняя имеет энергию Ферми всего лишь в несколько сотен милливольт. В результате первопринципных расчетов, выполненных в работах [1,2] для контактов Fe–Al₂O₃–Fe, были найдены значения энергий Ферми этих d -зон: $E_{F_2} = 0.35$ eV (зона со спином вниз) и $E_{F_1} = 2.25$ eV (зона со спином вверх).

Анализ, проведенный в работах [3,4], показал, что наличие на уровне Ферми малой группы носителей является необходимым условием для того, чтобы изучаемые структуры обладали отличным от нуля значением магнетосопротивления. Расчеты [3,4] подтверждают, что с ростом напряжения

смещения магнетосопротивление изучаемых туннельных структур должно убывать, что соответствует экспериментальным данным (см., напр., [5]).

Цель настоящей работы – продемонстрировать, что доказательство наличия на уровне Ферми малой электронной группы можно получить, проводя эксперименты в условиях высокого гидростатического сжатия, не выходя за рамки туннельного эксперимента.

Теоретическая модель

Рассмотрим туннелирование в системе FM–I–M. Следуя за автором работы [3], характер туннелирования считаем зеркальным (при таком туннелировании сохраняются как полная энергия туннелирующего электрона E , так и составляющая его квазиимпульса, параллельная плоскости туннельного перехода $k_{||}$).

Зависимость туннельной проводимости σ от напряжения смещения на переходе V обычно называют барьерной характеристикой, поскольку ее поведение полностью определяется параметрами потенциального барьера. Однако, как будет показано далее, в случае контактов FM–I–M последнее обстоятельство не выполняется, и, наряду с барьерными свойствами, зависимость $\sigma(V)$ отражает особенности электронной структуры ферромагнитных электродов.

Для того чтобы понять рассматриваемый эффект на качественном уровне, положим температуру T в расчетных формулах равной нулю. Считаем, что в металлическом электроде имеется одна вырожденная параболическая зона, энергия Ферми которой выше, чем у обеих зон ферромагнитного металла. Для определенности полагаем, что $E_F = 4$ eV, а эффективную массу электрона в такой зоне принимаем равной массе свободного электрона $m = m_0$. Вслед за авторами работ [2,3] считаем, что в ферромагнитном электроде в туннелировании участвуют две зоны: со спином вверх $E_{F_1} = 2.25$ eV и со спином вниз $E_{F_2} = 0.35$ eV. Для простоты полагаем эффективные массы в металлическом электроде m , в обеих зонах ферромагнитного электрода m_1 и m_2 , а также в диэлектрической прослойке m_d равными массе свободного электрона m_0 , т.е. $m = m_1 = m_2 = m_d = m_0$.

Исключим из рассмотрения процессы, приводящие к перевороту спина. Тогда можно считать, что туннелирование в контакте FM–I–M осуществляется в двух независимых каналах и общий туннельный ток представляет собой сумму двух слагаемых:

$$J(V) = J_1(V) + J_2(V), \quad (1)$$

где $J_1(V)$, $J_2(V)$ – туннельные токи, связанные с зонами соответственно со спином вверх и со спином вниз.

Считаем, что энергия Ферми металлического электрода E_F должна превышать энергии Ферми ферромагнитного электрода E_{F_1} , E_{F_2} . Учитывая это, запишем формулу тока для поляризации, при которой электроны из ферро-

магнетика туннелируют в металл, опуская постоянный коэффициент перед интегралом для тока $K_1 = \frac{2\pi me}{\hbar^3}$ (где m и e – соответственно масса и заряд свободного электрона, \hbar – постоянная Планка):

$$J_i(V) = \int_{E_{F_i}-eV}^{E_{F_i}} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z + \int_0^{E_{F_i}-eV} eVP(E_z, V) dE_z, \quad eV < E_{F_i},$$

$$J_i(V) = \int_0^{E_{F_i}} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z, \quad eV > E_{F_i},$$
(2)

где $P(E_z, V)$ – вероятность туннелирования, которая в полуклассическом приближении Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна имеет вид

$$P(E_z, V) = \exp\left(-2 \int_0^d k_z(z) dz\right).$$
(3)

Для противоположной полярности, при которой электроны туннелируют из металла в ферромагнитный электрод, формулы для тока представим в виде

$$J_i(V) = \int_{E_F-eV}^{E_F} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z + \int_{E_F-E_{F_i}-eV}^{E_F-E_{F_i}} eVP(E_z, V) dE_z, \quad eV < E_F - E_{F_i},$$

$$J_i(V) = \int_{E_F-eV}^{E_F} P(E_z, V)(E_{F_i} - E_z) dE_z + \int_0^{E_F-E_{F_i}} eVP(E_z, V) dE_z, \quad E_F - E_{F_i} < eV < E_F,$$
(4)

$$J_i(V) = \int_0^{E_F} P(E_z, V)(E_F - E_z) dE_z, \quad eV > E_F.$$

Опускаем постоянный коэффициент перед интегралом для тока $K_2 = \frac{4\pi me}{\hbar^3}$.

Дифференцируя (2) и (4) по напряжению смещения V , находим выражения для зависимости дифференциальной проводимости $\sigma(V) = dJ(V)/dV$ от напряжения смещения V на туннельном переходе:

$$\sigma_i(V) = \int_{E_{F_i}-eV}^{E_{F_i}} (E_{F_i} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z + e \int_0^{E_{F_i}-eV} \left[P(E_z, V) + V \frac{\partial P}{\partial V} \right] dE_z, \quad eV < E_{F_i},$$

$$\sigma_i(V) = \int_0^{E_{F_i}} (E_{F_i} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z, \quad eV > E_{F_i}.$$
(5)

Для обратной полярности имеем

$$\sigma_i(V) = \int_{E_F - eV}^{E_F} (E_{F_i} - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z + e \int_{(E_F - E_{F_i} - eV)\theta(E_F - E_{F_i} - eV)}^{E_F - eV} \left[P(E_z, V) + V \frac{\partial P}{\partial V} \right] dE_z +$$

$$+ eV^2 P(E_F - E_{F_i} - eV, V) \theta(E_F - E_{F_i} - eV), \quad E_F - E_{F_i} < eV < E_F,$$

$$\sigma_i(V) = \int_0^{E_F} (E_F - E_z) \frac{\partial P}{\partial V} dE_z, \quad eV > E_F,$$

где $\theta(E_F - E_{F_i} - eV)$ – ступенчатая функция Хевисайда, равная нулю при отрицательных значениях аргумента и единице – при положительных. Аналитическое выражение для производной туннельной прозрачности трапециoidalного барьера приведено в работе [6].

Обсуждение полученных результатов

До настоящего времени считалось, что поведение туннельной проводимости $\sigma(V)$ (до напряжений, не превышающих 1 V, при высоте барьера в несколько электрон-вольт) полностью определяется свойствами и параметрами потенциального барьера. В работе [7] было обнаружено, что зависимость

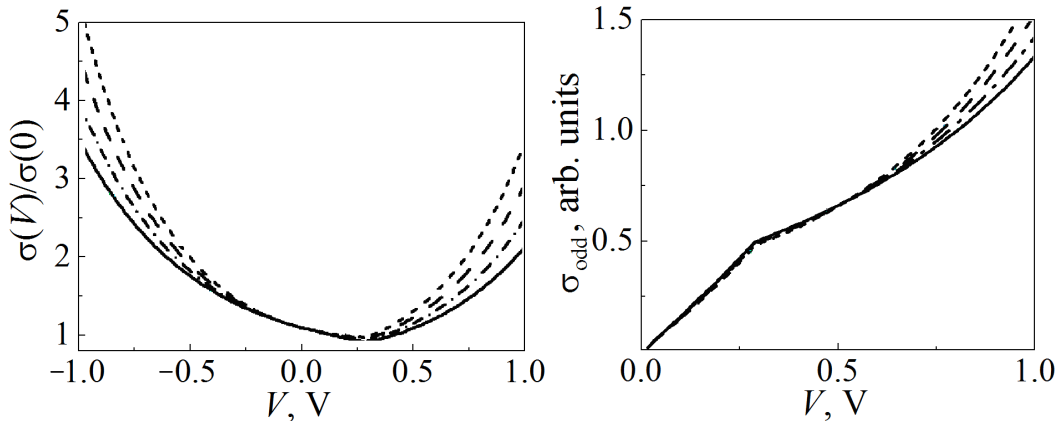


Рис. 1. Зависимость туннельной проводимости σ от напряжения смещения на переходе V для симметричного прямоугольного туннельного контакта FM–I–M с фиксированной высотой $\phi_L = \phi_R = 4$ eV при различной толщине туннельного барьера d , Å: — 10, - - - 11, - - - - 12, ···· - 13

Рис. 2. Нечетные части кривых дифференциальной туннельной проводимости (см. рис. 1) для прямоугольного туннельного контакта FM–I–M (обозначения те же, что на рис. 1)

дифференциальной проводимости от напряжения смещения для симметричного потенциального барьера имеет особенность. Полагая толщину потенциального барьера переменным параметром, получаем кривые проводимости, несимметричные относительно нуля напряжений (рис. 1). Исследование несимметричных по напряжению эффектов удобно проводить, используя так

называемую нечетную по напряжению часть дифференциальной туннельной проводимости (рис. 2):

$$\sigma_{\text{odd}}(V) = [\sigma(V) - \sigma(-V)]/2.$$

Согласно приближенной формуле (7) из работы [8]:

$$\frac{\sigma(V)}{\sigma(0)} = 1 - \left(\frac{A_0 \Delta\phi}{16\phi^{-3/2}} \right) eV + \left(\frac{9}{128} \frac{A_0^2}{\phi} \right) (eV)^2$$

(где $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$, $A_0 = 4(2m)^{1/2}d/3\hbar$ и $\sigma(0) = (3.16 \cdot 10^{10} \phi^{-1/2}/d)\exp(-1.25d \phi^{-1/2})$) нечетная часть туннельной проводимости для контактов FM–I–M в случае прямоугольного барьера должна тождественно равняться нулю. Однако, как показано на рис. 2, для таких контактов нечетная часть $\sigma_{\text{odd}}(V)$ существенно отличается от нуля, и в области напряжений, не превышающих нескольких сотен милливольт, возрастает приблизительно по линейному закону. Для наглядности мы вычли указанный линейный фон из кривых, представленных на рис. 2, и получили ряд зависимостей (рис. 3), имеющих особенность типа «пик проводимости» при напряжении смещения $V_p = 0.35$ eV, которое в точности соответствует значению энергии Ферми зоны со спином вниз $V_{F_2} = 0.35$ eV.

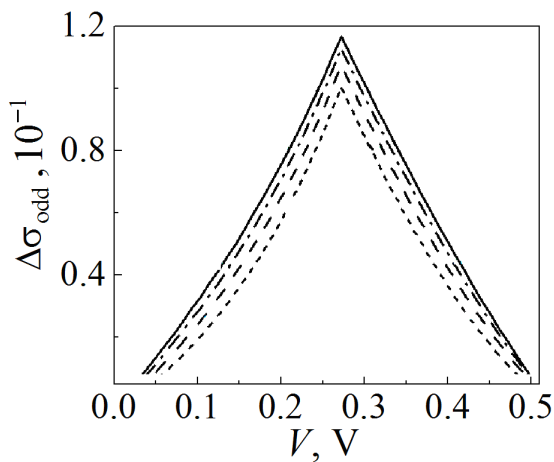


Рис. 3. Ожидаемое увеличение амплитуды особенности, соответствующей границе зоны со спином вниз ферромагнитного электрода под давлением (обозначения те же, что на рис. 1)

Выводы

На основе приведенных расчетов (рис. 1–3) можно сделать вывод, что поведение кривых $\sigma(V)$ для контактов FM–I–M отражает особенности электронного строения ферромагнитного электрода. Данное утверждение противоречит общепринятым положениям электронной туннельной спектроскопии о том, что в модели независимых электронов и параболических зон особенности плотности состояний не могут проявиться в туннельных характеристиках [9]. Действительно, плотности состояний электродов исследуемой туннельной структуры не входят в выражения для туннельного тока (2) и (4).

При малых напряжениях $eV \ll \phi$ прозрачность барьера $P(E_z, V)$ можно считать постоянной величиной и вынести ее за знак интегралов, которые будут представлять собой поток частиц, падающих на плоскость потенциального барьера. Как было показано в работах [10,11], ввиду зеркального характера туннелирования скорость изменения потока частиц из малой зоны в области напряжений от нуля до $eV = E_{F_i}$ линейно убывает до нуля, в то время как скорость изменения потока частиц из большой зоны в малую растет вплоть до $eV = E_F - E_{F_i}$. Это обстоятельство и приводит к отражению особенностей электронного зонного строения в туннельных характеристиках исследуемых контактов. В работе [12] показано, как наличие малой электронной группы в энергетическом спектре одного из электродов влияет на вольт-амперные характеристики туннельных гетероструктур.

Таким образом, проведенные нами расчеты туннельных характеристик контактов FM–I–M дают основание утверждать, что наличие малой зоны в электронном спектре ферромагнитного металла должно отчетливо проявляться в зависимости $\sigma(V)$ в виде пика проводимости при напряжении $V_p = E_{F_2} / e$. Рассматриваемый эффект чувствителен к толщине диэлектрической прослойки d , поэтому эксперименты при высоких давлениях могли бы дать убедительное доказательство того, что наблюдаемая на экспериментальной зависимости особенность в действительности отражает строение электронного спектра ферромагнитного электрода.

Вполне достижимые давления порядка 15–20 kbar при толщине барьера d в несколько нанометров способны уменьшить величину d на несколько процентов. Как показывают результаты расчетов (см. рис. 3), для двух близких значений d такого изменения толщины диэлектрического слоя достаточно для того, чтобы экспериментально зарегистрировать изменения в нечетной части проводимости и тем самым проверить предложенную теорию.

1. *W.H. Butler, X.-G. Zhang, T.C. Schulthess, M. MacLarren*, Phys. Rev. **B63**, 054416 (2001).
2. *A.H. Davis, J.M. MacLarren*, J. Appl. Phys. **87**, 5224 (2000).
3. *А.И. Хачатуров*, Письма в ЖЭТФ **82**, 728 (2005).
4. *А.И. Хачатуров*, ЖТФ **76**, 79 (2005).
5. *G. Feng, S. Dijken, T. Leo, D. Smith*, J. Appl. Phys. **105**, 03916 (2009).
6. *R.B. Floyd, D.G. Wamsley*, J. Phys. C: Solid State Physics **11**, 4601 (1978).
7. *Т.А. Хачатурова*, Вестник Луганского национального университета имени Владимира Даля № 5 (11), 135 (2018).
8. *W.F. Brinkman, R.C. Dynes, J.M. Rowel*, J. Appl. Phys. **41**, 1915 (1970).
9. *W.A. Harrison*, Phys. Rev. **123**, 8 (1961).
10. *В.М. Свистунов, А.И. Хачатуров, М.А. Белоголовский, О.И. Черняк*, ФНТ **22**, 605 (1996).
11. *А.И. Хачатуров*, ФНТ **31**, 109 (2005).
12. *Т.А. Khachaturova*, Adv. Mater. Technol. № 3, 47 (2017).

T.A. Khachaturova, A.Yu. Vlasenko

PRESSURE EFFECT ON THE DIFFERENTIAL CONDUCTANCE OF TUNNEL JUNCTIONS WITH A FERROMAGNETIC ELECTRODE

In the framework of a semiclassical approximation, the dependences of the differential tunnel conductance versus the bias voltage of tunnel junctions of ferromagnetic metal-insulator-metal type (FM-I-M) have been calculated. It is shown that there is a singularity of the bias voltage corresponding to the Fermi energy of the spin-down band that is registered as a kink of the curve of differential conductance. The odd part of the differential conductance calculated for a symmetrical rectangular barrier differs from zero. The analysis has shown that this fact reflects the asymmetry in the electron structures of metal and ferromagnetic electrodes.

Keywords: differential tunnel conductance, ferromagnetic electrode, Fermi energy, barrier characteristics

Fig. 1. Bias voltage V dependence of tunnel conductance σ for a symmetrical rectangular tunnel junction FM-I-M characterized by fixed height $\varphi_L = \varphi_R = 4$ eV under varied thickness of the tunnel barrier d , Å: — — 10, - · - · - 11, - - - - 12, ···· - 13

Fig. 2. Odd parts of the differential conductance (see Fig. 1) for a symmetrical rectangular tunnel junction FM-I-M (the symbols are the same as in Fig. 1)

Fig. 3. Expected increase in the magnitude of the kink associated with the boundary of the spin-down band of a ferromagnetic electrode under pressure (the symbols are the same as in Fig. 1)